Chapter four الفصل الرابع

المؤثرات الكميه Quantum Operators

المؤثر عباره عن عامل رياضي له لقدره على استخلاص المعلومات من الداله الموجيه التي تصف الجسيم وتحمل كل المعلومات المتعلقه به من قيم متوقعه مثل الموقع والطاقه والزخم......الخ. وعند التاثير على الداله اما ان يغير شكلها وينتج داله جديده او يعطي قيمه مضروبه بنفس الداله الاصليه (يغير طورها احيانا) وعندها تسمى الداله بالداله الذاتيه لهذا المؤثر. ولان الميكانيك الكمي هو نظريه خطيه مكا في معادلة شرودنجر او مبدأ جمع الحالات فمن الطبيعي ان تكون المؤثرات لها صفة الخطيه.

يمكن ان يكون المؤثر على شكل تفاضل (∇) او احداثي ($x, \ y, \ z$) او جذر ($\sqrt{}$) وتوضع عليه اشاره ($\wedge$) لتميزه عن غيره من الرموز

فاذا كانت لدينا داله تصف الجسيم مثل $\phi(x,t)$ ولدينا المؤثر $\hat{A}$ فان عملية التأثير تكون كالتالي

$$\hat{A}\phi(x,t) = a\phi(x,t)$$

نقول هنا ان الداله $\phi(x,t)$ هي دالة ذاتيه للمؤثر $\hat{A}$ لانها بقت محافظه على شكلها وان القيمة a هي قيمة ذاتيه للمؤثر $\hat{A}$

اما اذا كان التأثير من النوع التالي

$$\hat{A}\phi(x,t) = f(x,t) \qquad (1\text{-}4)$$

هنا تعتبر الداله $\phi(x,t)$ دالة غير ذاتيه للمؤثر $\hat{A}$ لان الناتج كان داله جديده هي $f(x,t)$

من خواص المؤثرات هي الصفه الخطيه وكمثال على ذلك

نقول ان المؤثر $\hat{A}$ يمتلك الصفة الخطيه اذا حقق العلاقه التاليه

$$\hat{A}(\phi_1 + \phi_2) = \hat{A}\phi_1 + \hat{A}\phi_2 \qquad (2\text{-}4)$$

فاذا كان المؤثر $\hat{A} = \frac{d}{dx}$ ولدينا الدالتين ϕ و ψ وكان التاثير بهذه الصوره

$$\hat{A}(\phi\psi) = \frac{d}{dx}(\phi\psi) = \phi\frac{d\psi}{dx} + \psi\frac{d\phi}{dx} \qquad (3\text{-}4)$$

نقول ان المؤثر $\hat{A}$ هو مؤثر خطي

وكذلك

$$\hat{A}(a\phi) = \frac{d}{dx}(a\phi) = a\frac{d\phi}{dx}$$

اذ ان a مقدار ثابت وبالتالي فان $\hat{A}$ مؤثر خطي

اذا كانت المؤثرات $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ يمكن كتابتها بالعلاقات الاتيه

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$$

$$\hat{C} = \hat{B} + \hat{A} \qquad (4\text{-}4)$$

$$\hat{A} = \hat{B}\cdot\hat{C}$$

$$\hat{B} = \hat{A} - \hat{C}$$

عندئذ يمكن القول ان هذه المؤثرات هي مؤثرات خطيه اي انها تخضع لعمليات الجمع والطرح والضرب

وانه بشكل عام فان $\hat{A}\cdot\hat{B} \neq \hat{B}\cdot\hat{A}$

مثلا اذا كان لدينا وان $\hat{B} = \frac{d}{dx}$ نرى ان تاثيرهما معا يكون كالتالي

$$(\hat{A}\cdot\hat{B})\psi = x\frac{d}{dx}\psi$$

بينما

$$(\hat{B}.\hat{A})\psi = \frac{d}{dx}x\psi = x\frac{d\psi}{dx} + \psi = (1 + x\frac{d}{dx})\psi$$

وهنا $x\frac{d}{dx} \neq (1 + x\frac{d}{dx})$ وبالتالي $\hat{A}\cdot\hat{B} \neq \hat{B}\cdot\hat{A}$

هناك علاقه اذا تحققت يقال ام المؤثرين $\hat{A}$ و $\hat{B}$ متبادلين وهي

$$\hat{A}\hat{B}\Psi - \hat{B}\hat{A}\Psi = 0$$

وهذا يعني

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

يمكن تمثل العلاقه اعلاه بقوس يسمى قوس تبادل

$$\left|\hat{A}, \hat{B}\right| = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad (5\text{-}4)$$

اذا كانت النتيجةتساوي صفر فان المؤثرين متبادلين والعكس صحيح.

لنرى ما اذا كان المؤثران x و $\frac{d}{dx}$ متبادلان ام لا؟

$$\left[x,\frac{d}{dx}\right]\psi = x\frac{d}{dx}\psi - \frac{d}{dx}(x\psi)$$

$$= x\frac{d}{dx} - (x\frac{d}{dx} + \psi\frac{dx}{dx})$$

$$= -\psi$$

بمعنى ان

$$\left[x,\frac{d}{dx}\right] = -1 \qquad (6\text{-}4)$$

لذلك فهما مؤثرين غير متبادلين

2--المؤثرات الهرميتيه   (ذاتية الترافق)   Hermetical Operators (Hermitian)

يسمى المؤثر $\hat{A}$ هرميتيا اذا حقق العلاقه التاليه

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\hat{A}\psi_2 dx = \int_{-\infty}^{\infty}(\hat{A}\psi_1)^*\psi_2 dx \qquad (7\text{-}4)$$

المعروف ان حاصل القياس هو مقدار حقيقي فمن باب اولى ان يكون المعدل لاي قياس ايضا حقيقي، بمعنى $<\hat{A}> = <\hat{A}>^*$ ولكن المرافق المعقد لحالة الضرب يعكس الامر مثل $(\psi^*\phi) = (\phi\psi)^*$

وهذا يجب ان يكون حقيقيا لكل الدوال الموجيه

$< f(x)\hat{A}|g(x) > = <\hat{A}f(x)|g(x) >$ لكل الدوال $f(x)$ و $g(x)$ مثل هذا المؤثر الذي يحقق هذه الميزه يسمى مؤثر هرميتيا.

(القيم المقاسة Observables تتمثلها مؤثرات هرميتيه). لنجرب مؤثر الزخم فيما اذا كان هرميتيا ام لا

$$< f\left|\hat{p}g\right> = \int f^{*}\frac{\hbar}{i}\frac{dg}{dx}dx = \frac{\hbar}{i}f^{*}g\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{df}{dx}\right)^{*}gdx = <\hat{P}f\left|g\right>$$

اذن مؤثر الزخم هرميتيا.

3- فضاء هلبرت والدوال المتعامده Hilbert space and orthogonal functions

يمكن وصف الفضاء العادي بالمحاور الثلاثيه (x, y, z) والمتجهات الاساسيه ($\vec{e}_i, e_j, \vec{e}_k$) التي طولها وحده واحده ومنطبقه على المحور التي تشير اليها وهذه المتجهات الاساسيه تحقق العلاقات الاتيه

$$e_i \cdot e_j = \delta_{ij}$$

أذ ان $i, j = 1,2,3$

$$|e_i = 1|$$

وباستطاعتنا تمثيل اي متجه بواسطة هذه المتجهات الاساسيه

$$r = e_i x + \bar{e}_j y + e_k z$$

أذ ان x, y, z تمثل مركبات المتجه r اي مساقطه على المتجهات الاساسيه.

ويمكن كتابة المتجه r كالاتي :

$$\vec{r} = \sum_{i=1}^{3}\vec{e}_i x_i \qquad (8-4)$$

يمكننا الان تعميم هذا الوصف لجعله ملائما لنظرية الميكانيك الكمي وذلك باخذ عددا غير محدود من الدوال (المتجهات الاساسيه) والتي هي دوال ذاتيه لمؤثر هرميتي وبها نستطيع توليد فضاء لا متناهي الابعاد له عدد غير محدود من المحاور مثل هذا الفضاء يسمى فضاء هلبرت وفيه كل الدوال متعامدة.

أذا كانت $U_n(r)$ تمثل الدوال الاساسيه فيمكن كتابة اي داله اخرى بدلالة هذه الدوال الاساسيه مثلا

$\Psi(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n U_n(\vec{r})$ اذ ان $U_n(\bar{r})$ تمثل المتجهات الاساسيه و C_n تمثل مساقط الداله $\Psi(r)$ على $U_n(r)$ ان مصطلح مساقط ليس دقيقا هنا لان

المتجه له قيمه واحده بينما الداله لها عدد غير محدود من القيم لذا فان C_n يمثل مساهمة الداله $U_n(r)$ في $\Psi(\bar{r})$، تسمى مجموعة الدوال الاساسيه $U_n(r)$ بمجموعه كامله اذا تحقق الشرط التالي

$$\lim_{m \to \infty} \left[\Psi(\vec{r}) - \sum_{n=1}^{m} C_n U_n(\vec{r}) \right] = 0 \qquad (9\text{-}4)$$

في الابعاد الثلاثه فان المقادير القابله للقياس تاتي من حاصل الضرب العددي

فمثلا طول متجه يمكن ايجاده من العلاقه $|r|^2 = \dot{r} \cdot \dot{r}$ او $|\vec{r}|^2 = \sum_{i=1}^{3} x_1^2$ والان نريد تطبيق هذا على الدوال في فضاء هلبرت

$$(\psi_1, \psi_2) = \int \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx$$

ولكي تكون الدوال متعامدة في فضاء هلبرت يجب ان تكون دوالا لمؤثر هرميتي او بعبارة اخرى (أذا كانت الدوال الاساسيه دوالا ذاتيه لمؤثر هرميتي فهي دوال متعامده) والان لنبرهن هذه العباره.

لنفرض الدوال الاساسيه U_n هي دوال ذاتيه للمؤثر الهرميتي $\hat{A}$ وهي دوال معايره ايضا

$$\hat{A} U_n = a_n U_n$$

$$\hat{A} U_m = a_m U_m$$

وعلى فرض ان $a_n \neq a_m$

نضرب المعادله الاولى في U_m^* وناخذ التكامل على كل الفضاء

$$\int_{-\infty}^{\infty} U_m^* \hat{A} U_n dx = a_n \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n dx$$

ناخذ المرافق المعقد للمعادله الثانيه ونضربه ب U_n^* من جهة اليمين ونكامل علىكل الفضاء

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{A}^* U_m^* U_n dx = a_m \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n dx$$

الطرف الايسر من المعادلتين الاخيرتين متساوي لان $\hat{A}$ مؤثر هرميتي وبالتالي يتساوى الطرف الايمن فيهما

$$a_m \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n dx = a_n \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n dx$$

$$(a_m - a_n) \int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n dx = 0$$

وبالفرض لدينا $a_m \neq a_n$ وعليه فان

$\int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n dx = 0$ او $\int_{-\infty}^{\infty} U_m^* U_n dx = \delta mn$ وهذا معناه ان U_m و U_n دوال متعامده

4- رموز ديراك Dirac notations

لقد ادخل ديراك بعض الرموز الى ميكانيك الكم لتسهيل وتبسيط كتابة الهلاقات الرياضيه

فمثل الرمز $\langle \, | $ للتعبير عن اي متجه حاله state vector فمثلا الحاله ψ تكتب $|\psi\rangle$ والرمز $\langle \, |$ يسمى ket كما يرمز لمتجه الحاله ψ^* بالرمز $\langle\psi|$ والرمز $\langle \, |$ يسمى Bra وعليه مربع طول اي متجه ϕ يكتب بالعلاقه

$$|\phi|^2 = \langle \phi | \phi \rangle$$

كما ان مبدأ جمع الحالات يكتب

$$|\Psi\rangle = \mu_1 |\psi_1\rangle + \mu_2 |\psi_2\rangle$$

كما ان الرمز $\langle \, | \, \rangle$ يسمى Braket

التكامل عل الدوال الاساسيه في فضاء هلبرت يكتب كالتالي

$$\int \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1 = \langle \psi(x) | \psi(x) \rangle$$

كذلك فالقيمه الذاتيه للمؤثر $\hat{A}$ تكتب

$$a = \langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \qquad (10\text{-}4)$$

5- التكامل بين دالتين ممزوجتين (متداخلتين) Overlap integral

لدينا

$$\phi_1 = \sum_i a_i U_i$$

$$\phi_2 = \sum_j b_j U_j$$

$$\langle\phi_1|\phi_2\rangle = \sum_i \sum_j a_i^* \, b_j \langle U_i | U_j\rangle$$

$$= \sum_i \sum_j \langle\phi_1|U_i\rangle\langle U_j|\phi_2\rangle\langle U_i|U_j\rangle$$

$$= \sum_i \sum_j \langle\phi_1|U_i\rangle\langle U_j|\phi_2\rangle\delta_{ij}$$

$$= \sum_i \langle\phi_1|U_i\rangle\langle U_i|\phi_2\rangle \qquad (11\text{-}4)$$

ويمكن حساب قيمه متوقعه من النوع

$$\langle\psi_1|A^2|\psi_2\rangle = \langle\hat{A}\psi_1|\hat{A}\psi_2\rangle$$

$$\phi_1 = \hat{A}\psi_1$$
$$\phi_2 = \hat{A}\psi_2$$

$$\langle\psi_1|A^2|\psi_2\rangle = \langle\phi_1|\phi_2\rangle$$

$$= \sum_i \langle U_i|\phi_1\rangle\langle\phi_2|U_i\rangle$$

$$= \sum_i \langle U_i|\hat{A}|\psi_1\rangle\langle\psi_2|\hat{A}|U_i\rangle$$

6- تمثيل المؤثرات بدلالة الدوال الاساسيه (U_i):

يمكن كتابة الداله ϕ

$$|\phi\rangle = \sum_i C_i|U_i\rangle$$

$$C_i = \langle U_i|\phi\rangle$$

$$|\phi\rangle = \sum_i \langle U_i|\phi\rangle|U_i\rangle$$

$$= \left(\sum_i |U_i\rangle\langle U_i|\right)|\phi\rangle$$

$$= \hat{I}|\phi\rangle \qquad (12\text{-}4)$$

أذ ان

$$\hat{I} = \sum_i |U_i\rangle\langle U_i| \qquad (13\text{-}4)$$

المؤثر $\hat{I}$ يسمى **مؤثر التماثل** Identity operator

يمكن التعبير عن $\langle\phi|$ بالصيغه الاتيه

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle$$

$$|\phi\rangle = \sum_i a_i |U_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |U_i\rangle$$

$$\hat{A}|\Psi\rangle = |\phi\rangle = \sum_i a_i |U_i\rangle$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \langle U_i|\phi\rangle |U_i\rangle$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \left\langle U_i \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle |U_i\rangle$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i \sum_j C_j \left\langle U_i \middle| \hat{A} \middle| U_j \right\rangle |U_i\rangle$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i,j} C_j \hat{A}_{ij} |U_i\rangle$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i,j} \langle U_j|\psi\rangle \hat{A}_{ij} |U_i\rangle$$

$$\hat{A}|\psi\rangle = \left[\sum_{i,j} \hat{A}_{ij} |U_i\rangle\langle U_j| \right] |\psi\rangle$$

اي ان

$$\hat{A} = \sum_{i,j} \hat{A}_{ij} |U_i\rangle\langle U_j|$$

أذ ان

$$\hat{A}_{ij} = \left\langle U_i \middle| \hat{A} \middle| U_j \right\rangle$$